

インタラクティブな進化計算を用いた触媒開発

松井 春美¹、奥山 修平¹、石若 裕子²、小西 修¹、小林 淳哉³

¹はこだて未来大学 (〒041-8655 函館市亀田中野町 116-2)

²北海道大学 (〒060-0814 札幌市北区北 14 西 9)

³函館工業高等専門学校 (〒042-8501 函館市戸倉町 14-1)

【緒言】

医薬品を開発する分野では、迅速に反応試験を行うことのできる装置(HTS 装置)の開発とともに遺伝的アルゴリズム(GA)などの進化計算を併用することによって、飛躍的な開発期間の短縮化を実現している。近年、固体触媒開発分野でも進化計算を取り入れた研究がいくつか進められているが、医薬品開発に比べ対象となる元素数の多い固体触媒開発では、最適な触媒組成探索の方向付けが困難であった。そこで本研究では、広範囲の探索を行うのに有効な免疫アルゴリズム(IA)を適用すると同時に、研究者の専門性も取り入れることによって、最適触媒組成の探索を行った。

【方法】

メタノールの水蒸気改質反応用の触媒探索を行った。触媒はアルミナに硝酸銅と硝酸亜鉛を物理混合し、400℃で4時間焼成することによって得た。反応は400℃で40分前処理を施した300℃の触媒に、メタノールと水をモル比1:1で混合した液5mlを気化させて導入した。発生した水素と二酸化炭素ならびに未反応のメタノールをガスクロマトグラフで測定した。

触媒反応結果を用いて、触媒に含まれる金属元素(Cu、Zn、Al)濃度を入力データ、水素の収率を出力データとして、人工ニューラルネットワーク(ANN)により触媒反応を近似した。続いて学習済みのANNを評価関数として、IAにより有用な触媒組成候補を提示させた。IA提案組成と併せて研究者提案組成の触媒を調製し、再び触媒反応を行った。

【結果】

1世代目は研究者が提案した組成5個の触媒について反応試験を行い、2-4世代目についてはIA提案組成と研究者提案組成を5個ずつ調製し反応試験を行った結果を図1に示した。2世代目でIAによって提示された組成が、研究者が提案した組成よりも高活性を示している。3世代目以降は研究者提案の方が高活性を示しているが、これは2世代目の結果を参考にしたためと考えられ、IAを用いない場合はさらに数世代の反応試験が必要だったのではないかと予想される。またIAのみでは3世代目以降活性の上昇が緩やかである。これらの結果から、IAに加えて研究者の専門性を駆使することによって、触媒探索の迅速化が実現できると期待される。

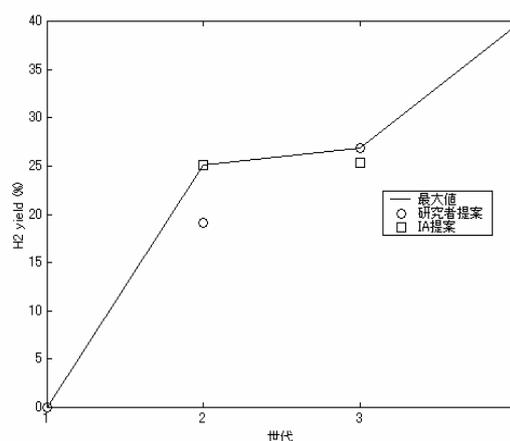


図1 水素収率の推移